非線型非平衡系のEvolution Criterion

阪大・工　一柳正和

線型不可逆過程は，minimum entropy productionの原理によって分析することができた。Glansdorff とPrigogineは，この原理を一般化して，非線型不可逆過程でのEvolution Criterionを導出した。[1] 彼らの論法は，局所平衡の仮定とLe Chatelier-Braun's lawを二本の柱とするものであった。一方，最近になって，非線型応答の理論が，Kubo理論の自然な発展として，新しく展開できることが示された。[2] その結果，上記のEvolution Criterionを統計力学的に取扱うことが出来ることになり，新しい熱力学的見地を得ることができた。

非線型応答理論の要点は，次の通りである。密度行列$\rho(t)$の方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)+i\left[H+V(t),\ \rho(t)\right]=0 \tag{1}$$

である。但し，外場の効果は，$V(t)=-\sum A_j\cdot F_j(t)$で扱えると仮定した。(1)の解として，次のものが有効である：

$$\rho(t)=\exp\{\beta[\psi+\phi(t)-H+\Phi(t)]\},\quad (e^{-\beta\psi}=\mathrm{Tr}\,e^{-\beta H}) \tag{2}$$

但し，c数$\phi(t)$と演算子$\Phi(t)$は次の方程式の解とする。

$$\frac{\partial}{\partial t}\{\phi(t)+\Phi(t)\}+i\left[H+V(t),\ \Phi(t)-H\right]=0. \tag{3}$$

Kuboの応答理論は，(2)を$\phi(t)+\Phi(t)$に関して一次までとする近似で再構成できる。(3)式で$\phi(t)$は次の様に書けることを要請しておく：

$$\dot{\phi}(t)=\sum \mathrm{Tr}\,\rho(t)\left[iH,\ A_j\right]F_j(t)=(\text{entropy production}). \tag{4}$$

$\Phi(t)$の表式は，次の通りである：

$$\phi(t)+\Phi(t)=\sum\int_{-\infty}^{t}dt'\,U(t,\ t')\{j_k-J_k(t')\}U^{\dagger}(t,\ t')F_k(t'). \tag{5}$$

この表式において，二種類のcurrentsが現れる点は重要な内容を成すことが知れる。即，それらの定義式は，

$$j_k=i\left[H,\ A_k\right] と \hat{J}_k(t)=i\left[\Phi(t),\ A_k\right] \tag{6}$$

であるが，この定義を用いるとき，fluctuation-dissipation theoremは

$$\mathrm{Tr}\,\rho(t)\cdot j_k=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\hat{J}_k(t)\quad(k=1,\cdots,\ f) \tag{7}$$

と書かれる。Kubo理論では(7)の左辺を外場について一次で展開するとき，右辺に現れているゆらぎの相関が定義されるとしているが，ここでは，左辺と右辺の各々いわば独立に定義されて導入されたものの本質的関係として(7)の形式を証明した訳である。

非平衡系の密度行列を(2)のようなGibbs型で導入することは，非平衡系の統計集団を導入することと同等である。Gibbs集団では，系のHamiltonian Hが果している役割を(2)では$\hat{H}(t)=H-\Phi(t)$が担うことになっている。局所平衡を仮定するときは，$\Phi(t)$は，巨視的変数のみで書けるということになる。$\Phi(t)$がこのように巨視的変数のみで書けないことが，系のentropy productionを論ずるときに重要となろう。

系のentropy SをS$=-\mathrm{Tr}\,\rho(t)\ln\rho(t)$，($k_B\equiv1$)，と定義するとき，このSは時間によっていないことは自明である。通常，この事のみから，「entropy productionはどうなったのか」という質問がなされて来た。しかし，よくよく考えてみると，次のような論理構造になることが判る。丁度(7)式に示した定理に対応して，二種類のentropy productionが存在できるのである。即，

$$\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{ex}=-\beta\,\mathrm{Tr}\,V(t)\,\partial\rho(t)/\partial t,\quad \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{in}=-\beta\,\mathrm{Tr}\,\Phi(t)\,\partial\rho(t)/\partial t. \tag{8}$$

とすれば，(7)式から，

$$\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{ex}+\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{in}=0 \tag{9}$$

という重要な結論を得る。従って，応答理論での不可逆性というものは，系内に起っている intrinsic process による entropy producion $(\partial S/\partial t)_{in}$を丁度，打消し去るように外場による entropy の減少がおこっている訳である。intrinsic process の方が，熱に不可逆的に転化する要因なのである。

非線型応答は，(7)式によって求まる。この式から，次の reciprocity を得る。

$$\frac{\partial J_l(t+\tau;B)}{\partial F_m(t)}=\varepsilon_l\varepsilon_m\frac{\partial J_m(t+\tau;-B)}{\partial F_l(t)} \tag{10}$$

但し，Bは磁場，ε_lはA_lの時間反転のparityである。$J_l(t;B)$は$\mathrm{Tr}\,\rho(t)\,j_l$。(10)の関係はOnsagerの相反関係の一般化式である。このような一般化は，平衡系でのゆらぎに関しては，Takahashi[3]によって示されたが，輸送現象でも(10)が成立することをここでは証明した。

Onsagerの散逸関数$\Phi[J,J]$からLegendre変換によって$\Psi[F,F]$を求める：

$$-\Psi[F,F]=\Phi[J,J]-\sum J_kF_k. \tag{11}$$

このことが可能ならば，[4] flux J_kは，$\Psi[F,F]$の汎函数微分で得られる。

$$J_k=\partial\Psi[F,F]/\partial F_k. \tag{12}$$

このような函数$\Psi[F,F]$が存在するならば，(10)式($\varepsilon_l\cdot\varepsilon_m=1$としたとき)が成立することは自明である。$\Psi[F,F]$が$J_l$を生みだすpotentialなのである。逆に，(10)式によって$\Psi[F,F]$が存在するこ

とが統計力学的に保障されていることになる。

今，熱力学的力 F_l の変分を ΔF_l とすると，$\Delta\Psi=\sum J_l[F]\cdot\Delta F_l$ となる。ここで $J_l=\Delta\alpha_l/\Delta t$ であることに注意すれば，

$$\frac{\Delta\Psi}{\Delta t}=\sum(\Delta\alpha_l)(\Delta F_l)/(\Delta t)^2 \tag{13}$$

一方，Le Chatelier-Braun's lawは $\sum(\Delta\alpha_l)(\Delta F_l)\leq 0$ を意味するので，結局

$$\frac{\Delta\Psi}{\Delta t}\leq 0. \tag{14}$$

Glansdorff-PrigogineのEvolution criterionである。

文　献

1）Glansdorff-Prigogine：構成・安定性・ゆらぎ（みすず，1977 松本ら訳）.
2）M. Ichiyanagi, J. P. S.（JPN）**55**（1986）2963.
3）H. Takahashi, J. P. S.（JPN）**7**（1952）439.
4）H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **51**（1974）1279.

Dissipative Quantum Field Theory
—— Spontaneous Creation of Dissipation in Thermo Field Dynamics ——

筑波大・物理　有光敏彦
アルバータ大・物理　梅沢博臣

§0. はじめに

非平衡統計力学の体系を，場の量子論的な方法論を用いて系統的に捕えられる様な，熱的な自由度（従って，散逸現象）も取り入れた新しい場の量子論の体系を築き上げる努力を，ここ2～3年進めてきた。[1-13] 密度演算子に基づいて非平衡解放系を扱う系統的一般論である減衰理論[14-20]で導かれたマスター方程式を，熱平衡系を扱う場の量子論として体系づけられていたThermo Field Dynamics（TFD）[21]の表現空間での基礎方程式に焼き直したのが出発点であった。[1,2] この基礎方程式が，少数の基本的要請から，簡単な演算子代数だけで導出できることが発見され，[3] この枠組で多時間関数に対する母汎関数を求めると，それがShwinger[22]やKeldish[23]のものと，特別な場合に，一致することが示された。[4] また，従来の場の量子論での，自由場に対するdivisor法が，散逸のある場の量子論にも拡張された。[7] さらに，非平衡過渡現象を扱うには，時間に依存したくり込み理論が必要になるが，[6,8] その定式化に便利な様に，体系がさらに整備，拡充され，[9-13]「散逸の自発的発生」という概念が見出された。

ここでは，この「散逸の自発的発生」に焦点を置いて，TFDの紹介をしたい。§1では，Liouville 方